

MÉTODO DE PUNTOS FINITOS. UN ANÁLISIS SOBRE EL EFECTO DE LOS PARÁMETROS QUE DEFINEN LAS NUBES EN APROXIMACIONES DE SEGUNDO Y CUARTO ORDEN

Enrique Ortega[†]

[†]Aula CIMNE, Facultad de Ingeniería. Instituto Universitario Aeronáutico
Av. Fuerza Aérea 6500 Córdoba, Argentina.
Correo electrónico: eortega@iua.edu.ar
Páginas web: <http://www.iua.edu.ar/>, <http://www.cimne.com/aulascimne/>

Palabras Clave: Método de Puntos Finitos, Mínimos cuadrados ponderados fijos, Aproximación de alto orden.

Resumen. *Se investiga en el presente trabajo la influencia de los distintos parámetros que definen la aproximación local en el Método de Puntos Finitos y su relación con la calidad de la misma. Este análisis se realiza sobre la solución de un problema de Poisson tridimensional el cual se emplea como caso testigo. Haciendo uso de este último se propone un método para ajustar los parámetros de la aproximación local mediante la definición individual de la función de ponderación en cada nube de puntos. Ello posibilita flexibilizar la definición de parámetros y lograr la mejor aproximación para el problema planteado. El análisis se extiende a funciones de aproximación de segundo y cuarto orden y distribuciones estructuradas y no estructuradas de puntos.*

1 INTRODUCCIÓN

El Método de Puntos Finitos (FPM) es una técnica de discretización conceptualmente sencilla que se ubica dentro del conjunto de métodos denominados ‘sin malla’ cuya característica principal es prescindir de una malla o grilla a efectos de realizar la discretización numérica. En FPM, la función incógnita y derivadas de la misma se obtienen exclusivamente a partir de las coordenadas de un conjunto de puntos pertenecientes al dominio de análisis. Esto último, sumado a un procedimiento de colocación puntual para la derivación del sistema de ecuaciones discreto, convierten a FPM en un ‘verdadero método sin malla’.

En FPM resulta de vital importancia la definición de las nubes de puntos donde se plantea la aproximación local a la función incógnita, la función de ponderación y los distintos parámetros que conciernen a estas dos últimas. La calibración de los parámetros que gobiernan la aproximación es un proceso complejo e involucra realizar numerosos estudios de sensibilidad a fin de poder lograr en conjunto la mejor aproximación para un problema dado.

Se estudian en el presente trabajo los distintos parámetros que definen la aproximación local y su influencia en las propiedades de esta última. Con el objetivo de flexibilizar la definición de dichos parámetros, se propone un método de ajuste de estos últimos basado en la manipulación de la función de ponderación en cada nube de puntos. Adicionalmente a través de dicha metodología es posible incrementar la calidad de la aproximación local y minimizar el error global en la misma para cada caso particular de cálculo. El análisis se extiende a funciones de aproximación de segundo y cuarto orden y distribuciones estructuradas y no estructuradas de puntos.

2 APROXIMACIÓN EN EL MÉTODO DE PUNTOS FINITOS

Register for free at <https://www.scipedia.com> to download the version without the watermark

Se desarrolla la aproximación a una función escalar $u(x)$ en un dominio cerrado $\Omega \in \mathbb{R}^n$, discretizado mediante un conjunto de puntos x_i , $i=1, n$. El problema se plantea en forma local por lo cual se divide el dominio Ω en subdominios Ω_i que denominamos *nubes de puntos*. Cada subdominio Ω_i esta conformado por un punto x_i denominado *punto estrella* y una colección de puntos x_j , $j=2, 3, \dots, np$ circundantes a x_i que completan Ω_i . Es importante aclarar que dichos subdominios Ω_i pueden superponerse entre sí.

Una aproximación a la función incógnita $u(x)$ se construye en Ω_i de la siguiente manera:

$$u(x) \cong \hat{u}(x) = \sum_{l=1}^m p_l(x) \alpha_l = P(x)^T \alpha(x) \quad (1)$$

donde $\alpha(x) = [\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m]^T$ es el vector de coeficientes que multiplica a cada uno de los términos de la base de aproximación $P(x)$ y m representa el número total de términos de esta última. Se emplea en este trabajo una base de aproximación polinómica completa, definida en forma local y adimensional¹, dada por

$$P^T(x) = \left[1, \left(\frac{x_j - x_i}{d_{i_{\max}}} \right), \left(\frac{x_j - x_i}{d_{i_{\max}}} \right)^2, \dots, \left(\frac{x_j - x_i}{d_{i_{\max}}} \right)^k \right] \quad (2)$$

donde $d_{i_{\max}}$ corresponde a la distancia ente el punto estrella x_i y el punto más alejado de la nube y k es el grado del polinomio de mayor orden que está incluido en la base. Luego, la función incógnita $u(x)$ es obtenida para los np puntos en Ω_i de la siguiente manera

$$u^h = \begin{Bmatrix} u_1^h \\ u_2^h \\ \vdots \\ u_{np}^h \end{Bmatrix} \cong \begin{Bmatrix} \hat{u}_1 \\ \hat{u}_2 \\ \vdots \\ \hat{u}_{np} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} p_1^T \\ p_2^T \\ \vdots \\ p_{np}^T \end{Bmatrix} \alpha(x) = P^T \alpha(x) \quad (3)$$

donde $u_j^h = u(x_j)$ es el valor de la función incógnita $u(x)$ en un punto x_j del subdominio, $\hat{u}_j = \hat{u}(x_j)$ es el valor aproximado en el mismo y $P_j = P(x_j)$.

Para que el sistema de ecuaciones (3) pueda ser resuelto es necesario que se cumpla la condición $m=np$, con lo cual el procedimiento de aproximación planteado se convierte en una interpolación. Esta restricción impuesta a la aproximación penaliza la flexibilidad de la misma y no es adecuada para un método sin malla. Para solucionar este problema se recurre a un procedimiento de minimización global del error en la aproximación a la función $u(x)$ en Ω_i . A tal fin se construye el siguiente funcional discreto $J(x)$, ponderado mediante una cierta función de peso $\phi(x_j)$ que otorga carácter local a la aproximación.

Register for free at <https://www.scipedia.com> to download the version without the watermark

$$J(x) = \sum_{j=1}^{np} \phi(x_j) [u_j - \hat{u}(x_j)]^2 = \sum_{j=1}^{np} \phi(x_j) [u_j - P^T(x_j) \alpha(x)]^2 \quad (4)$$

Se observa que la elección de $\phi(x)=1$ conduce a un procedimiento de aproximación mediante Mínimos Cuadrados estándar (LSQ).

La inclusión de una función de ponderación es un rasgo común en todos los Métodos sin Malla. Generalmente se denomina a este tipo de funciones como funciones de soporte compacto debido a que el subdominio en las cuales las mismas son no nulas es pequeño respecto al dominio total del problema. En general las funciones de ponderación empleadas son isotrópicas y su soporte es circular aunque es posible también introducir funciones anisotrópicas. Si bien existe amplia libertad en la elección de las funciones de ponderación, las mismas deben cumplir ciertas condiciones básicas que se enuncian a continuación.

$$\begin{aligned} \phi_k(x_j) &> 0 \quad \forall x_j \in \Omega_i \\ \phi_k(x) &= 0 \quad \forall x \notin \Omega_i \\ \phi_k(x_k) &= 1 \end{aligned} \quad (5)$$

La aproximación mediante *Mínimos Cuadrados Ponderados* (WLSQ) depende de la forma de la función de ponderación escogida y de la manera en que esta última es aplicada. Si se elige

una función de ponderación móvil el método de aproximación que se obtiene es el *Método de Mínimos Cuadrados Ponderados Móviles* (MLS). En este último se define el tamaño y la forma de la función de ponderación y se traslada la misma sobre el subdominio de tal manera que siempre se obtenga su valor máximo en el punto donde la función incógnita y sus derivadas deseen ser evaluadas. Mediante este procedimiento se obtiene una definición única y global de las funciones de forma a expensas de un elevado costo computacional.

Con el objetivo de simplificar este procedimiento se propuso el empleo de una función de ponderación $\varphi(x)$ fija en cada subdominio Ω_i que satisfaga las condiciones enunciadas en (5). En este caso el punto x_k definido en dicha instancia como arbitrario es reemplazado por el punto estrella de la nube x_i , es decir, la función de ponderación se ubica centrada en el punto estrella. A través de este último procedimiento se simplifica considerablemente la aplicación del método y disminuye el costo computacional con la desventaja de que las funciones de forma obtenidas son discontinuas. Este tipo de aproximación se denomina *Mínimos Cuadrados Ponderados Fijos* (FLS) y puede considerarse como un caso particular de MLS.

La función de ponderación que se adopta de forma corriente en FPM es la función Gausseana normalizada definida por la siguiente expresión

$$\varphi_i(x_j) = \frac{e^{-\left(d_j/\alpha\right)^k} - e^{-\left(\beta/\alpha\right)^k}}{1 - e^{-\left(\beta/\alpha\right)^k}} \quad (6)$$

donde d_j es la distancia que existe entre un punto cualquiera x_j del subdominio Ω_i y el punto estrella x_i , $\alpha = \beta/w$ y $\beta = \gamma d_{max}$ siendo d_{max} la distancia entre el punto estrella y el punto más alejado del subdominio. El factor γ es una constante ligeramente mayor a la unidad introducido con el propósito de que la función de ponderación no se anule en los puntos extremos del subdominio.

Debido a la elección de una función de ponderación fija, el funcional discreto definido por (4) se independiza de las coordenadas espaciales de los puntos que forman el subdominio de aproximación, para un Ω_i dado. Teniendo en cuenta esto último es posible escribir dicho funcional discreto de la siguiente manera

$$J_i = \sum_{j=1}^{np} \varphi_i(x_j) \left[u_j^h - p^T(x_j) \alpha \right]^2 \quad (7)$$

Retomando el proceso de aproximación se definen las siguientes matrices

$$A = P \Phi(x_i) P^T = \sum_{j=1}^{np} \varphi_i(x_j) p(x_j) p^T(x_j) \quad (8)$$

$$B = \Phi(x_i) P = \left[\varphi_i(x_1) p(x_1) , \varphi_i(x_2) p(x_2) , \dots , \varphi_i(x_{np}) p(x_{np}) \right] \quad (9)$$

Minimizando la expresión (7) respecto de los coeficientes α e introduciendo matrices A y B , definidas por expresiones (8) y (9) respectivamente, se obtiene

$$A\alpha = Bu^h \quad (10)$$

$$\alpha = A^{-1}Bu^h = C^{-1}u^h \quad (11)$$

Luego, reemplazando (11) en (1), la aproximación a la función incógnita en Ω_i resulta

$$\hat{u}(x) = P^T\alpha = P^T(x)C^{-1}u^h = N^T(x)u^h = \sum_{j=1}^{np} N_j^i u_j^h \quad (12)$$

donde $N^T(x)$ corresponde a las funciones de forma calculadas en cada nube de puntos.

En concordancia con el procedimiento FLS empleado, la aproximación a la función incógnita es definida exclusivamente en cada subdominio de aproximación Ω_i y válida en un entorno muy reducido del punto estrella. Esto último conduce a que puntos pertenecientes a una zona del dominio Ω donde se superpongan dos o más subdominios de aproximación, posean funciones de forma multivaluadas, es decir, $N_j^i \neq N_j^k$. Debido a lo anterior la función aproximada mediante expresión (12) debe ser utilizada para obtener el valor de la función incógnita $u(x)$ y sus derivadas solamente en una región específica de cada dominio de aproximación Ω_i suficientemente cercana a su punto estrella. Aunque este método cumple en forma local con las condiciones de existencia y consistencia de MLS no es posible obtener una solución globalmente continua incluso en el interior de cada subdominio Ω_i . Se manifestará más adelante que la elección de un esquema de discretización mediante la técnica de Colocación Puntual permitirá de manera sencilla cumplir esta última condición impuesta a la aproximación.

2.1 Orden de aproximación de las funciones de forma

Register for free at <https://www.scipedia.com> to download the version without the watermark

En FLS, los coeficientes α son constantes en cada Ω_i y el orden de la aproximación es directamente el orden del polinomio incluido en la base de aproximación $P(x)$.

2.2 Derivadas de las funciones de forma

En FLS las matrices A y B son constantes en cada Ω_i , por lo cual las derivadas de las funciones de forma (12) se calculan simplemente como

$$\frac{\partial^k N^T}{\partial x^k} = \frac{\partial^k P^T}{\partial x^k} A^{-1} B = \frac{\partial^k P^T}{\partial x^k} C^{-1} \quad (13)$$

2.3 Discretización de las ecuaciones

Debido a las características de multievaluación que poseen las funciones de forma calculadas mediante FLS, resulta natural adoptar en FPM una técnica de *Colocación Puntual* a fin de obtener el sistema de ecuaciones discreto. Además de ser este procedimiento adecuado para brindar a la aproximación el carácter local que la misma necesita, convierte al Método de Puntos Finitos en un ‘verdadero método sin malla’².

3 CONSIDERACIONES PRELIMINARES

De acuerdo con el proceso de aproximación desarrollado anteriormente, es posible observar que para poder calcular correctamente las funciones de forma en cada nube de puntos, es necesario que la matriz A dada por expresión (8) sea invertible y además que su inversa sea obtenida con precisión. Esto último exige que:

- El número de puntos que conforman la nube sea mayor o igual al número de términos linealmente independientes de la base de aproximación empleada ($np \geq m$).
- La nube de puntos posea una estructura ‘no degenerada’, es decir, para cualquier sistema de ejes ortogonales arbitrarios se debe proyectar en ambas direcciones una cantidad mínima de puntos dependiendo del orden de la base de aproximación empleada.

Una forma de evaluar y predecir la calidad de la aproximación para una nube de puntos dada, es a través de propiedades de la matriz A , como lo son su norma y número de condición. El número de condición de una matriz es un parámetro adimensional y simétrico que provee de manera cuantitativa la posición relativa entre dicha matriz y una considerada ideal. El número de condición puede tomar valores entre $1 \leq \text{cond}(A) \leq \infty$, siendo el número de condición infinito si el determinante de la matriz es nulo. Matrices que posean números de condición pequeños (del orden de la unidad) se consideran ‘bien condicionadas’ y por el contrario, matrices con un número de condición elevado se consideran ‘mal condicionadas’ y generalmente su inversión no puede realizarse con precisión.

Desde el punto de vista de la ‘invertibilidad’ de una matriz general, el indicador empleado por excelencia es el número de condición de esta última. La norma encierra y cuantifica valiosas características geométricas y por ello es utilizada también como indicador en ciertos análisis específicos. En el presente caso no queda clara la interpretación geométrica de la norma de la matriz A y si bien se presentan los resultados para esta última, no son utilizados en el presente análisis.

Si se observa la estructura de la matriz A dada por expresión (8), es posible identificar en su composición dos matrices de Vandermonde (V) multiplicadas por una matriz diagonal. Como resultado de este producto se obtiene una matriz con características similares a las matrices de Vandermonde, lo cual es muy común en procesos de aproximación e interpolación. Dichas matrices poseen una estructura tal que $V_{i,j} = x_i^{n-j}$ y ‘por naturaleza’ son mal condicionadas. Por ello existe necesariamente un cierto grado de mal condicionamiento en la matriz A pero el mismo se debe mantener acotado a fin de poder invertir correctamente la misma.

Para detectar en forma temprana problemas en la aproximación se propone¹ un límite superior al grado de mal condicionamiento de la matriz A dado por

$$\text{cond}_{\text{lim}}(A) = f \text{cond}_{\text{ideal}} \quad (14)$$

donde f es una constante para la cual se toman valores entre 20 y 200 y $\text{cond}_{\text{ideal}}$ es el número de condición de la matriz A obtenida para una nube considerada óptima. En el caso

bidimensional esta última corresponde a una nube de 7 puntos que forma un hexaedro perfecto centrado en su punto estrella.

Si se pretende automatizar el proceso de aproximación o que el mismo no resulte excesivamente usuario-dependiente, es necesario obtener relaciones entre los parámetros que definen la aproximación y la calidad de la misma. De manera adicional se debe poseer algún método que permita ajustar estos parámetros para cada nube de puntos y lograr en conjunto la mejor aproximación para un problema dado. A tal fin se plantea en este trabajo el siguiente procedimiento.

La calidad de la aproximación local dependerá en primera instancia del número y distribución de puntos que conforman la nube. Resulta costoso desde el punto de vista computacional trabajar en la optimización de la aproximación con parámetros como lo son el número de puntos de la nube y su distribución, ya que esta última será función de la primera y de características propias de la geometría que se desea modelar. En este caso se debe recurrir a técnicas adaptables. Por ello se propone para la generación de las nubes escoger un número de puntos mínimo necesario a fin de cumplir con el límite impuesto al número de condición de la matriz A dado por la expresión (14). Esto representa un umbral de mal condicionamiento ‘aceptable’ en la matriz pero no garantiza la obtención de una buena aproximación. Es común observar un deterioro en esta última si se aumenta el número de puntos de la nube mas allá de un determinado valor, que puede ser mayor o igual al necesario para cumplir con la condición (14).

Posteriormente al armado de las nubes de puntos se propone modelar cada una de ellas a través de la definición individual de la función de ponderación. Mediante ello es posible, de manera sencilla, lograr un efecto similar a variar el número de puntos de la nube o darle a ésta una orientación o distribución determinada (esto último en el caso de emplear funciones de ponderación no isotrópicas). Para el proceso de ajuste de la función de ponderación de cada nube se adopta como parámetro indicador el número de condición de la matriz A .

Finalmente resta cuantificar o determinar el valor o rango de valores del número de condición (logrado a través del ajuste de la función de ponderación) para los cuales es posible obtener *a posteriori* una aproximación de calidad en dicha nube. Esto se determina estudiando el comportamiento del error en la aproximación con respecto al número de condición de la matriz A . Cabe aclarar que dicho estudio de sensibilidad se realiza sobre un problema testigo que se presenta a continuación.

4 ANÁLISIS DE INFLUENCIA DE LOS PARÁMETROS

A fin de realizar el análisis mencionado en el párrafo anterior, se propone como caso testigo la solución de un problema de Poisson dado por

$$\nabla^2 u = f(x, y, z) \quad (15)$$

planteado en un dominio cúbico centrado en $(x, y, z) = (0.5, 0.5, 0.5)$, de lados de longitud unitaria. Se imponen solamente condiciones de contorno del tipo Dirichlet: $u = 0$ en $0 < x < 1$, $0 < y < 1$ y $0 < z < 1$. El término $f(x, y, z)$ corresponde a una fuente volumétrica exponencial definida por la siguiente expresión

$$f(x, y, z) = \left\{ \begin{aligned} &-2kyz(1-y)(1-z) + [kyz(1-y)(1-z)(1-2x)^2]^2 \\ &-2kxz(1-x)(1-z) + [kxz(1-x)(1-z)(1-2y)^2]^2 \\ &-2kxy(1-x)(1-y) + [kxy(1-x)(1-y)(1-2z)^2]^2 \end{aligned} \right\} \frac{e^{kxyz(1-x)(1-y)(1-z)}}{1 - e^{k/64}}$$

para la cual se adopta $k = 200$. Se obtiene para el problema planteado la siguiente solución analítica

$$u(x, y, z) = \frac{1 - e^{kxyz(1-x)(1-y)(1-z)}}{1 - e^{k/64}} \quad (16)$$

A fin de poder realizar comparaciones entre las distintas aproximaciones se define una norma cuadrática del error global^{1,3}, tanto para la variable como así también para sus derivadas, dada por

$$e = \frac{1}{\phi_{\max}^e} \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (\phi_j^e - \phi_j^c)^2} \quad (17)$$

en la cual el superíndice e se refiere a la solución exacta del problema obtenida según la expresión (16) y c corresponde a la solución calculada numéricamente, siendo n el número de puntos total del dominio.

4.1 Función de ponderación. Efectos de 'w'

Como se mencionó anteriormente la función de ponderación que se emplea en FPM es la función Gaussiana. Analizando la misma expresión se presentan (6). Analizando los distintos parámetros que definen la forma de la función de ponderación se observa que d_{\max} depende de la nube de puntos ya definida por lo tanto no está sujeto a modificación. El parámetro γ permite dar mayor o menor peso, dentro del proceso de aproximación, a los puntos extremos del subdominio pero su efecto no es considerable y se adopta para el mismo un valor constante $\gamma = 1.001$. Finalmente el exponente k no es tenido en cuenta por razones que son puestas de manifiesto *a posteriori*.

En vista de estas últimas consideraciones, el único parámetro posible de modificar a fin de cambiar la forma de la función de ponderación en una nube de puntos dada es el parámetro w . Mediante la variación del parámetro w de la función de ponderación se modifica el peso asignado a todos los puntos de la nube, modificando el carácter local de la aproximación. El principal punto de interés en el parámetro w radica en que sin importancia del número y distribución de puntos que posea la nube, el comportamiento de este último demuestra ser directamente proporcional al número de condición de la matriz A . Es decir, el parámetro w se encuentra directamente relacionado con el grado de condicionamiento de la matriz A lo cual constituye el objetivo del ajuste que se pretende realizar. Se demostrará más adelante que mediante la sola modificación del parámetro w es posible reproducir el efecto de variar el número y distribución de puntos que componen la nube.

Si bien es posible a través de la variación del exponente k lograr un efecto parecido a variar w , éste produce variaciones bruscas en las características de la aproximación que hacen que dicho proceso sea insensible a pequeños ajustes. Por esta razón se desestima el empleo del parámetro k como variable de ajuste y se adopta para el mismo un valor constante $k = 2$.

A continuación en la Figura 1 se muestra el efecto de la variación de w en la forma de la función de ponderación, obtenida para el caso unidimensional en una nube de puntos equiespaciada centrada respecto del eje de ordenadas.

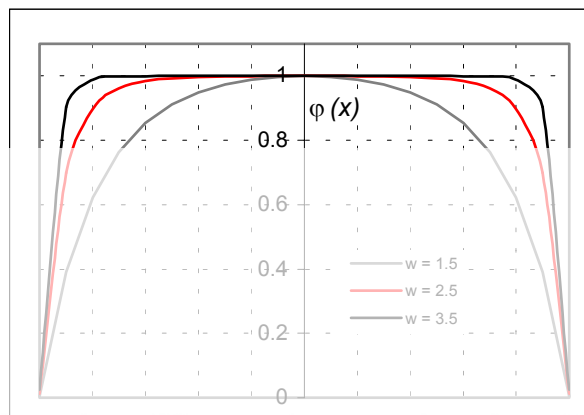


Figura 1: Efectos del parámetro w en la función de ponderación (caso unidimensional)

Para el caso testigo propuesto se analiza a continuación el efecto de la variación del parámetro w en una nube de puntos cuyo punto estrella se ubica en las coordenadas $(x,y,z)=(0.5,0.5,0.5)$. El dominio del problema se discretiza mediante una distribución arbitraria no estructurada de 5700 puntos y se emplea aproximación de segundo y cuarto orden de derivada de la función de forma. Se emplean nubes de 80 y 90 puntos para la aproximación de mayor orden. El parámetro w se varía en un rango comprendido entre $0 < w < 10$ y se detectan los límites para los cuales la matriz A cumple con la condición impuesta por la expresión (14). Dentro del rango admisible de valores de w se investiga el efecto de la variación del mismo en la norma de la matriz A y su número de condición. En todos los casos el número de condición de A se calcula según $cond(A) = \|A\| \|A^{-1}\|$ y se emplea la norma euclídea o cuadrática de dicha matriz.

Se puede observar en este ensayo numérico que, en el caso de emplear aproximación de cuarto orden en conjunto con una distribución estructurada de puntos, aumenta notoriamente el número mínimo de puntos requerido para cumplir con la condición (14), respecto de la distribución no estructurada arbitraria (para idéntica densidad de puntos). Para el caso estructurado la aproximación resulta más débil y el número de condición mínimo de la matriz A requerido a fin de satisfacer (14) es de un orden de magnitud mayor respecto del caso no estructurado. Sin embargo se observa que los números de condición máximos admisibles para la nube se ubican dentro del mismo orden de magnitud en ambas distribuciones de puntos, para idéntico valor de w . En el caso de emplear aproximación cuadrática la diferencia entre ambas distribuciones de puntos es menor. Como ejemplo de esto último se cita el caso de

aproximación de cuarto orden y un valor de $w=3.5$. Para este último, el número mínimo de puntos requerido para cumplir (14) es de 160 puntos en el caso estructurado mientras que en el caso no estructurado son necesarios solamente 70 puntos y el número de condición de la matriz A en ambas distribuciones es del orden de $1.0E8$.

Cabe hacer notar que a medida que el parámetro w se incrementa, el procedimiento de aproximación mediante FLS tiende a convertirse en un procedimiento LSQ estándar.

Los límites del parámetro w a fin de cumplir con la condición (14) se presentan en la Tabla 1. Valores de w prácticamente nulos destruyen el soporte a la aproximación con lo cual es posible que se generen problemas numéricos. Como consecuencia de esto último los límites inferiores del parámetro w deben ser tomados con precaución.

np	w (sup. e inf.)	$\text{norma}(A)$	$\text{cond}(A)$
25	7.64	1.000045	$5.4E+14$
25	$1E-8$	5.28	200
35	8.84	1.00003	$7.6E+13$
35	$8E-8$	15.8	153

Tabla 1: Límites superior e inferior del parámetro w (caso $O(2)$)

En la Figura 2 se muestra la evolución de la norma de la matriz A y de su número de condición en función del parámetro w , para el caso de aproximación cuadrática y distribución de puntos no estructurada. En el caso de nubes constituidas con una mayor cantidad de puntos el rango de w admisible aumenta debido a que la nube posee un mayor soporte para la aproximación. Los valores límites, inferiores y superiores, para el número de condición y la norma de la matriz se mantienen invariables para nubes con distinta cantidad de puntos a las ensayadas y para ambos tipos de distribuciones, sea la misma estructurada o no estructurada.

Se aprecia en la Figura 2 que el parámetro w es inversamente proporcional a la norma de la matriz A y proporcional a su número de condición. Si se mantiene un valor de w fijo se puede observar que el comportamiento del número de condición en función del número de puntos de la nube es similar al obtenido mediante la sola variación del parámetro w . En base a esto es posible inferir que a través de la variación del parámetro w es factible reproducir el efecto de aumentar o disminuir el número de puntos de la nube. También se observa evidencia de ello en la Tabla 1.

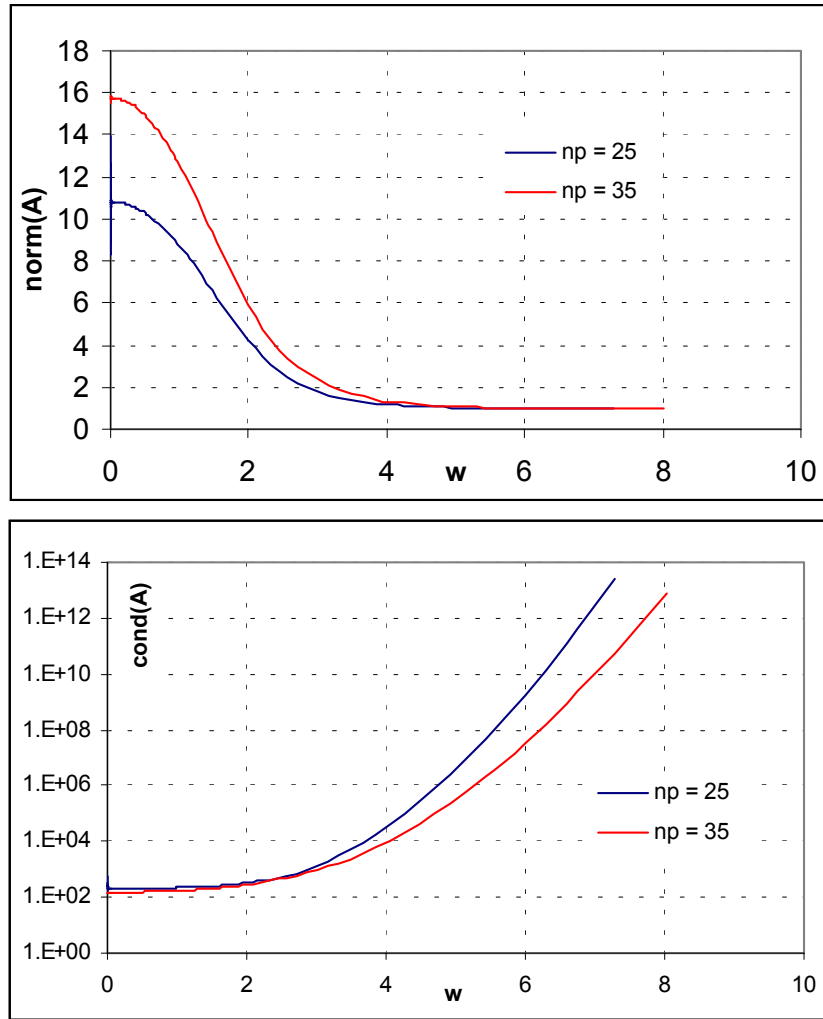


Figura 2: Norma y número de condición de la matriz A en función del parámetro w ($O(2)$)

Para el caso de aproximación de cuarto orden se realiza un ensayo idéntico con distribuciones de 80 y 90 puntos no estructurados. Los resultados se muestran a continuación en la Tabla 2 y Figura 3.

np	w (inf. y sup.)	$\text{norma}(A)$	$\text{cond}(A)$
80	7.27	1.027	$3.7E+14$
80	$1.3E-8$	51.7	$2.4E+4$
90	7.64	1.027	$5.7E+13$
90	$4.3E-8$	41.9	$1.9E+4$

Tabla 2: Límites superior e inferior del parámetro w (caso $O(4)$)

Para la aproximación de cuarto orden se verifica un comportamiento similar a la de segundo orden. Con respecto a los límites de w impuestos por condición (14) que se presentan en la Tabla 2 existe una diferencia en el número de condición mínimo admisible en relación a la

aproximación de segundo orden. Esto denota un mayor grado de mal condicionamiento en la matriz A para el caso de cuarto orden, favorecido por el mayor número de puntos que conforman el soporte de la aproximación.

En la Figura 3 es posible notar que para la aproximación de cuarto orden, el número de condición de la matriz A presenta una menor sensibilidad al número de puntos de la nube.

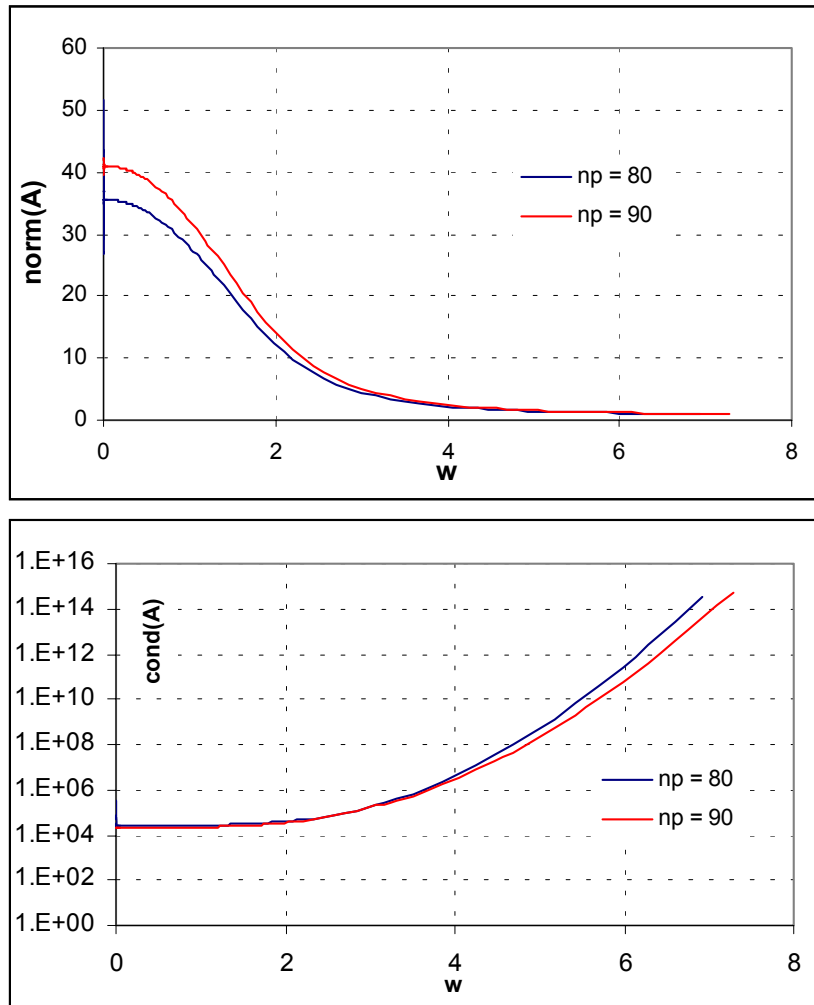


Figura 3: Norma y número de condición de la matriz A en función del parámetro w ($O(4)$)

En vista de los resultados obtenidos, es posible afirmar que mediante la sola variación del parámetro w es factible lograr idénticas propiedades de la matriz A , sin importancia de la cantidad de puntos y distribución de los mismos en la nube. En todos los casos estudiados se pudo corroborar que la relación entre el parámetro w y el número de condición de la matriz A se mantiene invariable, lo cual da validez a la elección de w como variable de ajuste.

El límite superior al número de condición de la matriz A impuesto en (14) se mantiene en el mismo orden para todos los casos estudiados y para los distintos tipos de aproximación. Este límite dado por $\text{cond}(A) \approx 1.0E14$ representa el máximo nivel de mal condicionamiento de A

que se permite en la aproximación. Por debajo de este último debe existir un rango de números de condición de la matriz A para los cuales se obtiene la mejor aproximación al problema planteado. Dicho valor se determina mediante un análisis de la evolución del error en la aproximación, tomando como variable independiente el número de condición de la matriz A .

Se apreciará más adelante que es necesario mantener un cierto grado de mal condicionamiento en la matriz A , demostrándose que el buen condicionamiento de la misma, logrado a través del parámetro w , no devendrá en una buena aproximación.

4.2 Relación entre el número de condición de la matriz A y la calidad de la aproximación

Con motivo de investigar el comportamiento del error en la aproximación en función del número de condición de la matriz A resulta necesario definir los parámetros de análisis en forma global. Se calcula para ello un número de condición promedio, $cond'(A)$, de todas las nubes en las que se discretiza el problema. Dadas las características del dominio la desviación en el número de condición no es considerable y es posible tomar este número de condición promedio como representativo de todas las nubes que conforman el dominio del problema. A continuación, para el presente análisis, cuando se menciona el número de condición de la matriz A se hace referencia a dicho número de condición promediado. Adicionalmente, el error global en la aproximación se calcula según la expresión (17) para la función incógnita, obteniéndose un comportamiento similar para las derivadas de la misma.

Se estudian a continuación dos distribuciones de puntos, una distribución estructurada de $18 \times 18 \times 18$ que genera un total de 5832 puntos y otra distribución arbitraria no estructurada con un total de 5750 puntos, obteniéndose para ambas una densidad de puntos similar. Se emplea aproximación de segundo orden con nubes de 25, 35 y 45 puntos en ambos casos, estructurado y no estructurado. Aproximación de cuarto orden se estudia para nubes de 80, 90 y 100 puntos en el caso no estructurado y nubes de 160, 180 y 200 puntos en el caso estructurado. El sistema de ecuaciones discreto se resuelve mediante un ‘*solver*’ iterativo de gradientes conjugados y para todos los casos de estudio se fija el error límite o de corte para este último en $1E-25$.

Para el caso de aproximación cuadrática y distribución de puntos no estructurada, se presenta en la Figura 4 la evolución del error en la aproximación y el número de condición promedio del problema, en función del parámetro w .

Si se adopta un valor constante del parámetro w , se observa que al aumentar el número de puntos de la nube se incrementa el error en la aproximación hasta un cierto nivel más allá del cual este último permanece aproximadamente constante. Desde el punto de vista del número de condición de la matriz A , al aumentar el número de puntos de la nube se genera un mejor condicionamiento de esta última pero como se expuso anteriormente esto no deviene en un menor error en la aproximación a la función incógnita. Al incrementarse el valor del parámetro w y por consiguiente el número de condición de la matriz A se observa que el error en la aproximación disminuye hasta un valor mínimo mas allá del cual permanece aproximadamente constante ($np = 45$) o crece lentamente ($np = 25$ y 35).

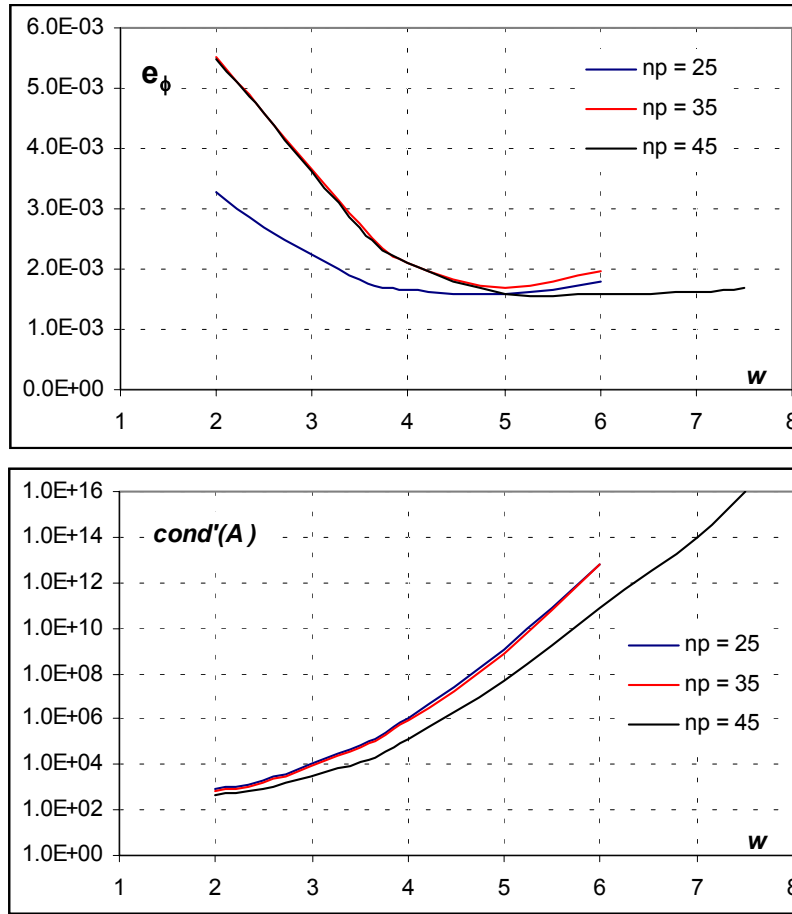


Figura 4: Error en la aproximación y número de condición promedio. Caso no estructurado $O(2)$

Para un determinado rango de valores del parámetro w , el número de puntos de la nube no tiene influencia significativa en el error, con lo cual la calidad de la aproximación pierde sensibilidad al número de puntos de las nubes. Esto es beneficioso por cuanto mediante el uso del parámetro w como variable de ajuste sería posible independizarse del número de puntos de la nube. Esto último requiere, para cada nube, especificar un número suficiente de puntos para cumplir con la condición (14) y además lograr un buen soporte a la aproximación local que permita un rango aceptable de variación del parámetro w .

Para el caso de cálculo con aproximación de cuarto orden se observa en la Figura 5 un comportamiento similar al encontrado para aproximación de segundo orden y una notable disminución de la magnitud de los errores con respecto a esta última. En lo que respecta a los límites admisibles del parámetro w se reproduce el comportamiento hallado para el estudio individual de una nube aislada. En el caso de aproximación de cuarto orden se mantiene el mismo límite superior para el número de condición de la matriz A ($1.0E14 \sim 1.0E16$) pero se incrementa el límite inferior ($1.0E3 \sim 1.0E6$).

Tanto el error en la aproximación como así también el número de condición presentan una menor sensibilidad al número de puntos de las nubes, lo cual pone en evidencia la mayor solidez que posee la aproximación de cuarto orden respecto de la de segundo orden. El rango

de valores del parámetro w que minimiza el error es más reducido que el obtenido en el caso de cálculo anterior. Superado dicho rango el error crece abruptamente caso contrario a lo sucedido con aproximaciones de segundo orden y aproximaciones de cuarto orden y distribución no estructurada de puntos, para las cuales el error permanece aproximadamente constante o crece muy lentamente.

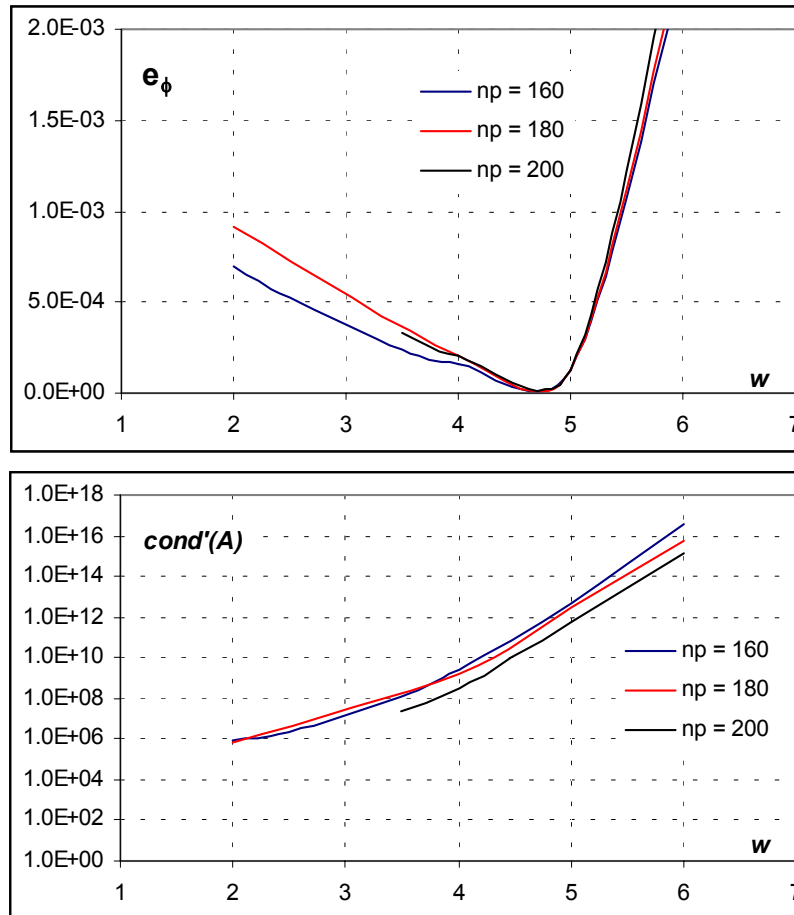


Figura 5:Error en la aproximación y número de condición promedio. Caso estructurado $O(4)$

Los resultados obtenidos son comparados en la Figura 6 para distribuciones estructuradas y no estructuradas de puntos. Queda de manifiesto la necesidad que presenta la aproximación de mayor orden de incrementar notoriamente el número de puntos de las nubes a fin de lograr idénticas propiedades de la matriz A . Se observa para este último tipo de aproximación, un mejor comportamiento de la distribución de puntos no estructurada respecto de la distribución estructurada; caso contrario a lo que ocurre con la aproximación de segundo orden.

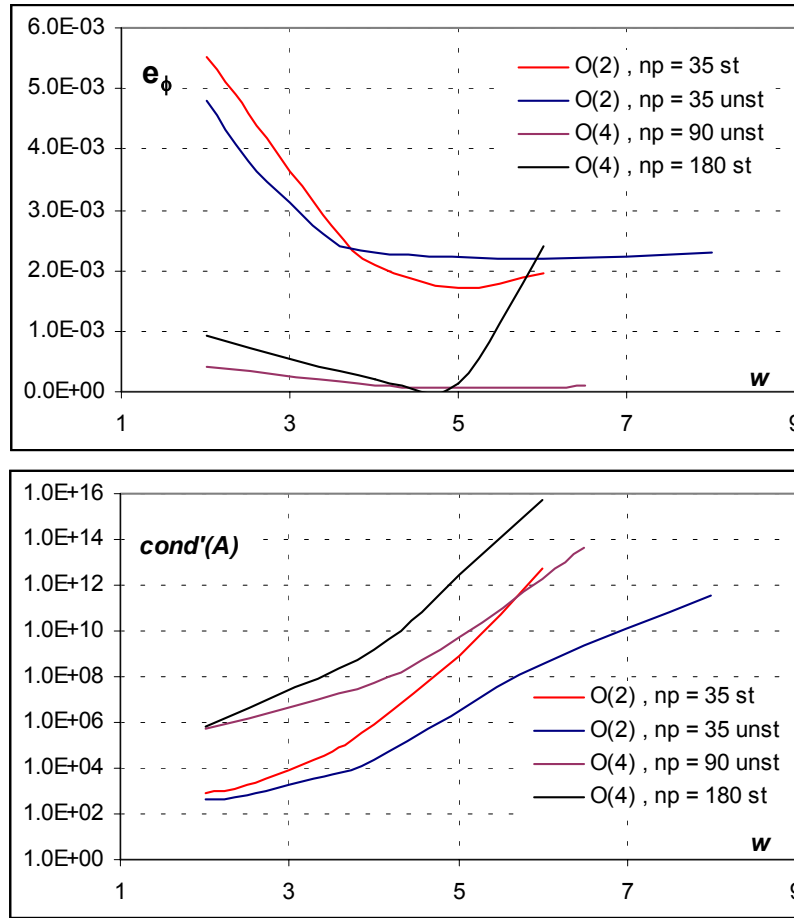


Figura 6: Distribución de puntos estructurada vs. no estructurada. Caso $O(2)$ y $O(4)$

De los resultados expuestos es posible determinar en forma tentativa un rango de variación del número de condición para el cual se minimiza el error global en la aproximación a la función incógnita. Se observa que el parámetro w que minimiza el error global tiene un valor de aproximadamente $w = 5$ para todos los casos estudiados. Los rangos de variación del número de condición presentados a continuación en la Tabla 3 son válidos tanto para el caso de distribución estructurada y no estructurada de puntos.

Aproximación	$cond(A)_{\text{óptimo}}$
$O(2)$	$1.E7 - 1.E10$
$O(4)$	$1.E10 - 1.E12$

Tabla 3: Rango del número de condición que minimizan el error en la aproximación

Finalmente, para el caso de aproximación cuadrática y distribución de puntos estructurada, se presenta en la Figura 7 el efecto del número de condición de la matriz en la cantidad de iteraciones del ‘solver’ necesarias a fin de obtener un residuo menor o igual a $1.0E-25$. En los demás casos de cálculo es posible observar un comportamiento similar.

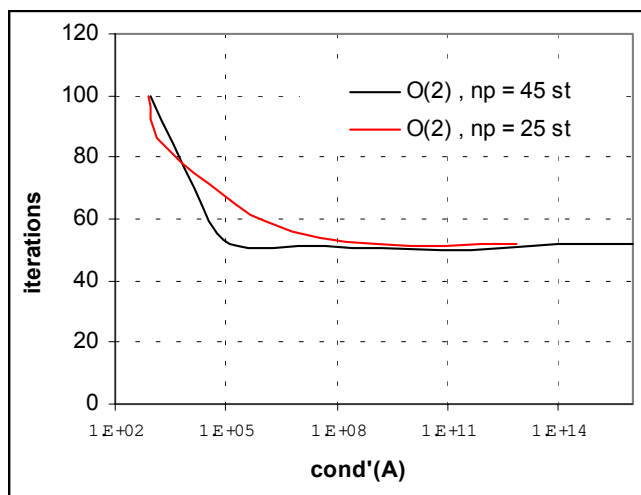


Figura 7: Número de iteraciones del solver vs. el número de condición de A. Caso O(2) estructurado

Se observa que para el rango de números de condición en los cuales se minimiza el error global, también se logra un efecto positivo en el mejor condicionamiento del sistema de ecuaciones. Ello es puesto en evidencia por la disminución de iteraciones que necesita realizar el ‘solver’ a fin de alcanzar el residuo requerido.

4.3 Convergencia del método

La velocidad de convergencia de la variable y sus derivadas, obtenidas mediante FPM en conjunto con el método propuesto de ajuste de la función de ponderación, se compara con velocidades de convergencia obtenidas mediante FPM¹ y métodos tales como FEM y ‘Meshless Finite Element Method’ (MFEM)³.

Para el análisis se emplean las siguientes distribuciones de puntos equiespaciados: 10x10x10 (n=1000), 18x18x18 (n=5832) y 34x34x34 (n=39304). La norma del error global se calcula de acuerdo con la expresión (17) y se define además un parámetro de densidad de puntos h de la siguiente manera

$$h = h_x = h_y = h_z = \frac{1}{\sqrt[n]{n} - 1} \quad (18)$$

Las velocidades de convergencia de la variable y sus derivadas son calculadas para cada una de las distribuciones propuestas empleando aproximación de segundo y cuarto orden y los resultados se presentan en las Figuras 8 y 9 respectivamente. Los mismos se resumen en la Tabla 4.

A continuación en la Tabla 5 se comparan las velocidades de convergencia obtenidas mediante el presente método (denotado por w^+), con aquellas halladas por otros autores. Se puede observar que las velocidades de convergencia obtenidas para el presente caso de estudio resultaron menores a aquellas obtenidas por¹. Queda de manifiesto además la superioridad que presenta la aproximación de cuarto orden respecto a la aproximación cuadrática y demás resultados presentados.

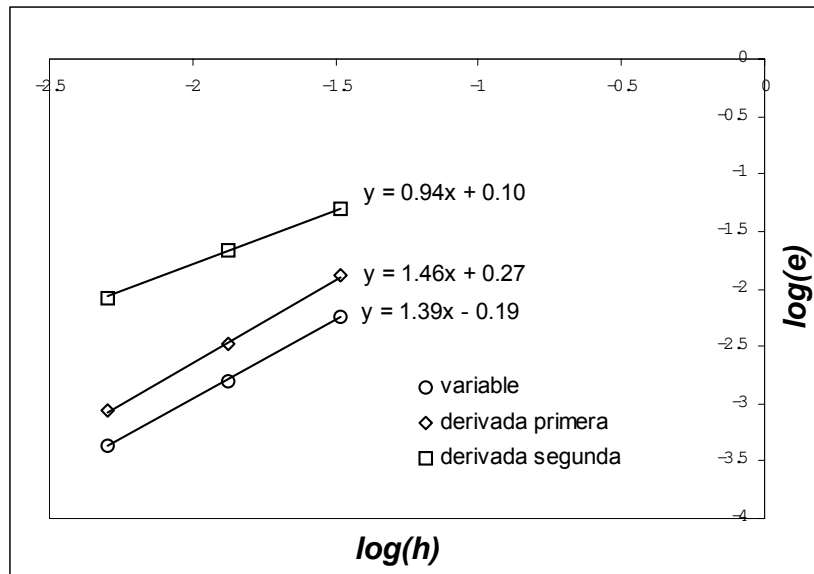


Figura 8: Velocidades de convergencia $O(2)$

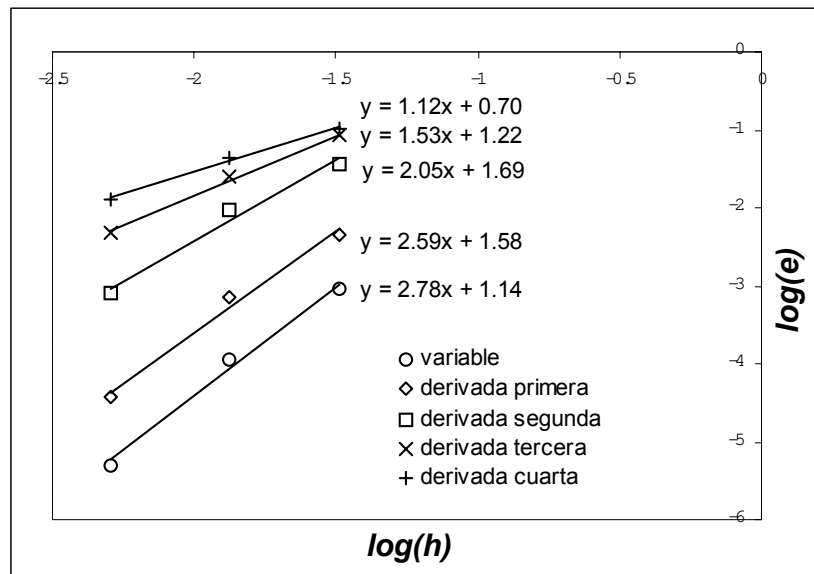


Figura 9: Velocidades de convergencia $O(4)$

<i>Velocidades de Convergencia</i>	$O(2)$	$O(4)$
Variable :	1.39	2.78
Derivada primera :	1.46	2.59
Derivada segunda :	0.94	2.05
Derivada tercera :	---	1.53
Derivada cuarta :	---	1.12

Tabla 4 : Velocidades de convergencia para la variable y derivadas, casos $O(2)$ y $O(4)$

	$FPM^{w+} - O(2)$	$FPM^{w+} - O(4)$	$FPM [1]$	$MFEM [3]$	$FEM [3]$
Variable :	1.39	2.78	1.93	1.71	1.26
Derivada primera :	1.46	2.59	1.8	1.68	0.67

Tabla 5: Velocidades de convergencia. Comparación de resultados con otras fuentes

5 CONCLUSIONES

Se investiga en el presente trabajo una metodología destinada a sintetizar la definición de parámetros que determinan la aproximación local en el Método de Puntos Finitos.

En los ensayos numéricos realizados sobre el problema testigo se pudo corroborar la relación propuesta entre el error global en la aproximación y la variable indicadora, así como también el buen funcionamiento del parámetro de ajuste local de la aproximación. Los rangos de variación de la variable indicadora en los cuales se minimiza el error en la aproximación resultan insensibles a la distribución de puntos y orden de aproximación de las funciones de forma, lo cual es un indicio de generalidad de la relación propuesta entre los parámetros y la calidad de la aproximación. Una aplicación posterior de dicha metodología a la solución de un problema de flujo compresible tridimensional⁴ arroja buenos resultados. Se observa para este último caso un notable incremento en las cualidades de la aproximación que se reflejan en el comportamiento del esquema de cálculo. Es interesante hacer notar que esto último no actúa en detrimento de las propiedades locales de la aproximación en cada nube de puntos.

No obstante, la validación de la metodología descrita requiere un estudio pormenorizado de la misma y su aplicación a distintos casos de cálculo. Los efectos de su implementación en cada uno de ellos deben ser evaluados, especialmente en casos de cálculo que involucren geometrías complejas o la generación de nubes de puntos muy deformadas o con densidades de puntos muy disímiles.

6 REFERENCIAS

- [1] Sacco C., ‘*Desarrollo del Método de Puntos Finitos en Mecánica de Fluidos*’, Tesis Doctoral, Escola Tècnica Superior d’Enginyers de Camins, Canals i Ports de Barcelona, Universitat Politècnica de Catalunya (2001)
- [2] Oñate, E., Idelsohn, S., Zienkiewicz, O.C., Taylor, R.L., ‘*A Finite Point Method in Computational Mechanics. Applications to Convective Transport and Fluid Flow*’, Int. J. Num. Meth. Eng. 39: 3839-3866.(1996)
- [3] Idelsohn, S., Oñate, E., Calvo, N., Del Pin, F., ‘*Comparaciones de Meshless Finite Element Method en Nube de Puntos Random*’, Centro Internacional de Métodos Computacionales en Ingeniería, INTEC, CONICET, UNL.[Documento WWW]
- [4] Ortega, E., ‘*Aplicación del Método de Puntos Finitos a la Solución de las Ecuaciones de Flujo Compresible*’, Trabajo Final de la Maestría en Ciencias de la Ingeniería ‘Mención Aeroespacial’. Instituto Universitario Aeronáutico, Universidad Nacional de Córdoba (2004)